Dinâmica Hamiltoniana Aplicada
Capítulo 3
Transformações Canônicas

Prof. Ricardo Luiz Viana
rlv640@gmail.com

Instituto de Física da USP

Conteúdo da aula

Transformações canônicas

Colchetes de Poisson

Transformações de contato infinitesimais

Conexão com a Mecânica Quântica

Espaço de fase

Transformações canônicas

- sistema com n graus de liberdade descrito pelas variáveis canonicamente conjugadas (p_i, q_i)
- podemos fazer uma transformação destas variáveis antigas para novas variáveis (P_i, Q_i)
- a transformação é canônica se as equações de Hamilton tiverem a mesma forma tanto para as variáveis antigas como para as novas.
- equações de Hamilton nas variáveis antigas $(i = 1, 2, \ldots n)$

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H(p_i, q_i, t)}{\partial q_i}, \qquad \frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H(p_i, q_i, t)}{\partial p_i},$$

- equações de Hamilton nas variáveis novas

$$\frac{dP_i}{dt} = -\frac{\partial K(P_i, Q_i, t)}{\partial Q_i}, \qquad \frac{dQ_i}{dt} = \frac{\partial K(P_i, Q_i, t)}{\partial P_i},$$

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L\, dt = \delta \left\{ \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\sum_{i=1}^{n} p_i \dot{q}_i - H(p_i, q_i, t) \right] \right\} = 0.$$

Função geratriz

- Princípio de Hamilton modificado

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L\, dt = \delta \left\{ \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\sum_{i=1}^{n} p_i \dot{q}_i - H(p_i, q_i, t) \right] \right\} = 0.$$

- se as equações de Hamilton têm as mesmas formas nas novas variáveis, o princípio de Hamilton também deve valer para elas

$$\delta \left\{ \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\sum_{i=1}^{n} P_i \dot{Q}_i - K(P_i, Q_i, t) \right] \right\} = 0.$$

- os integrandos de ambas as expressões podem diferir, no máximo, pela derivada total de uma função arbitrária do tempo, que chamaremos "função geratriz"
- estamos interessados em funções geratrizes de variáveis mistas (uma antiga e uma nova)
- há quatro espécies de funções geratrizes deste tipo

Função geratriz de primeira espécie

- função geratriz de primeira espécie: $F_1(q_i, Q_i, t)$

$$\left[\sum_{i=1}^{n} p_i \dot{q}_i - H(p_i, q_i, t)\right] - \left[\sum_{i=1}^{n} P_i \dot{Q}_i - K(P_i, Q_i, t)\right] = \frac{dF_1}{dt}$$

- a derivada total da função geratriz é

$$\frac{dF_1(q_i, Q_i, t)}{dt} = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial F_1}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F_1}{\partial Q_i} \dot{Q}_i \right) + \frac{\partial F_1}{\partial t},$$

- comparando os termos semelhantes temos as equações da transformação canônica de primeira espécie

$$p_i = \frac{\partial F_1(q_i, Q_i, t)}{\partial q_i}, \qquad (i = 1, 2, \ldots n)$$

$$P_i = -\frac{\partial F_1(q_i, Q_i, t)}{\partial Q_i},$$

$$K(P_i, Q_i, t) = H(p_i, q_i, t) + \frac{\partial F_1(q_i, Q_i, t)}{\partial t}.$$

Função geratriz de segunda espécie

- $F_2(q_i, P_i, t)$: é a mais importante, na prática
- é a transformada de Legendre de F_1

$$F_2(q_i, P_i, t) = \sum_{i=1}^{n} Q_i\, P_i + F_1(q_i, Q_i, t).$$

$$\frac{dF_2}{dt} = \frac{dF_1}{dt} + \sum_{i=1}^{n} \left(\dot{Q}_i\, P_i + Q_i\, \dot{P}_i \right).$$

$$\sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial F_2}{\partial q_i}\, \dot{q}_i + \frac{\partial F_2}{\partial P_i}\, \dot{P}_i \right) + \frac{\partial F_2}{\partial t} =$$

$$\sum_{i=1}^{n} \left\{ p_i\, \dot{q}_i - H - P_i\, \dot{Q}_i + K + \dot{Q}_i\, P_i + Q_i\, \dot{P}_i. \right\}.$$

- equações da transformação canônica de segunda espécie

$$p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i}, \qquad Q_i = \frac{\partial F_2}{\partial P_i}, \qquad K = H + \frac{\partial F_2}{\partial t}.$$

Funções geratrizes de terceira e quarta espécies

- terceira espécie

$$F_3(p_i, Q_i, t) = F_1(q_i, Q_i, t) - \sum_i q_i p_i,$$

- equações da transformação canônica

$$q_i = -\frac{\partial F_3}{\partial p_i}, \qquad P_i = -\frac{\partial F_3}{\partial Q_i}, \qquad K = H + \frac{\partial F_3}{\partial t}.$$

- quarta espécie

$$F_4(p_i, P_i, t) = F_1(q_i, Q_i, t) - \sum_i p_i q_i + \sum_i P_i Q_i,$$

- equações da transformação canônica

$$q_i = -\frac{\partial F_4}{\partial p_i}, \qquad Q_i = \frac{\partial F_4}{\partial P_i}, \qquad K = H + \frac{\partial F_4}{\partial t}$$

Oscilador harmônico

- Hamiltoniana: $H(p,q) = Gp^2/2 + Fq^2/2$
- função geratriz de primeira espécie

$$F_1(q,Q) = \sqrt{F/G}\, q^2 \operatorname{cotg} Q/2$$

- equações da transformação canônica

$$p = \frac{\partial F_1}{\partial q} = \sqrt{\frac{F}{G}}\, q \operatorname{cotg} Q, \qquad P = -\frac{\partial F_1}{\partial Q} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{F}{G}}\, \frac{q^2}{\operatorname{sen}^2 q},$$

- resolvendo para as variáveis antigas em termos das novas

$$q = \left(\frac{G}{F}\right)^{1/4} \sqrt{2P}\, \operatorname{sen} Q, \qquad p = \left(\frac{F}{G}\right)^{1/4} \sqrt{2P}\, \cos Q,$$

- Kamiltoniana: $K(P,Q) = H(p(P,Q), q(P,Q)) =$ $P\sqrt{FG}(\cos^2 Q + \operatorname{sen}^2 Q) = P\sqrt{FG}$
- equações de Hamilton nas novas variáveis

$$\frac{dP}{dt} = -\frac{\partial K}{\partial Q} = 0, \qquad \frac{dQ}{dt} = \frac{\partial K}{\partial P} = \sqrt{FG}.$$

$$P(t) = P(t=0), \qquad Q(t) = Q(t=0) + t\sqrt{FG}.$$

Partícula num campo magnético uniforme

- Hamiltoniana ($\Omega = eB_0/m$)

$$H = \frac{1}{2m}\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right) + \Omega y p_x + \frac{1}{2} m\Omega^2 y^2 .$$

- primeira TC: $(x, y : p_x, p_y) \to (\phi, Y; P_\phi, P_Y)$
- função geratriz de primeira espécie

$$F_1(x, y; \phi, Y) = m\Omega[(1/2)(y - Y)^2 \mathrm{cotg}\,\phi - xY]$$

- equações da transformação canônica

$$p_x = \frac{\partial F_1}{\partial x} = -m\Omega y, p_y = \frac{\partial F_1}{\partial y} = m\Omega(y - Y)\mathrm{cotg}\,\phi,$$

$$P_\phi = -\frac{\partial F_1}{\partial \phi} = \frac{1}{2} m\Omega(y - Y)^2 \mathrm{cosec}^2\phi$$

$$P_Y = -\frac{\partial F_1}{\partial Y} = m\Omega\left[(y - Y)\mathrm{cotg}\,\phi + x\right].$$

- isolando $y = Y + \sqrt{2P_\phi/m\Omega}\sin\phi$, donde a Kamiltoniana é

$$\tilde{K}(p_z, P_\phi) = \frac{1}{2m} p_z^2 + \Omega P_\phi .$$

Partícula num campo magnético uniforme

- segunda TC: $(\phi, Y, z; P_\phi, P_Y, p_z) \to (\phi, Y, Z; P_\phi, P_Y, P_Z)$
- função geratriz de segunda espécie: $F_2(P_Z, z) = zP_Z$ gera a transformação identidade

$$Z = \frac{\partial F_2}{\partial P_Z} = z, \qquad p_z = \frac{\partial F_2}{\partial z} = P_Z.$$

- nova Kamiltoniana

$$K(P_Z, P_\phi) = P_Z^2/2m + \Omega P_\phi.$$

- equações de Hamilton

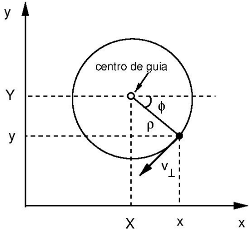
$$\dot{\phi} = \frac{\partial K}{\partial P_\phi} = \Omega, \qquad \dot{Y} = \frac{\partial K}{\partial P_Y} = 0, \qquad \dot{Z} = \frac{\partial K}{\partial P_Z} = \frac{P_Z}{m},$$

$$\dot{P}_\phi = -\frac{\partial K}{\partial \phi} = 0, \qquad \dot{P}_Y = -\frac{\partial K}{\partial Y} = 0, \qquad \dot{P}_Z = -\frac{\partial K}{\partial Z} = 0.$$

- como K é cíclica em ϕ, Y e Z os momenta conjugados são constantes do movimento, em termos das quais definimos

$$\rho = \sqrt{2P_\phi}m\Omega, \qquad X = P_Y/m\Omega$$

Partícula num campo magnético uniforme



- colocando em evidência as variáveis x e y obtemos

$$x = X + \rho\cos\phi, \qquad y = Y - \rho\sin\phi.$$

- (X, Y, Z): coordenadas do centro de guia, que é o centro de uma circunferência de raio $\rho = mv_\perp/eB_0 = v_\perp/\Omega$, onde $v_\perp = \sqrt{v_x^2 + v_y^2}$, e ϕ é a girofase, com momentum conjugado

$$P_\phi = m\Omega\rho^2/2 = mv_\perp^2/2\Omega = m\mu/e$$

- momento de dipolo magnético ($\tau = 2\pi/\Omega$ é o giro-período)

$$\mu = (e/\tau)(\pi\rho^2) = e\Omega\rho^2/2$$

Colchetes de Poisson

- os colchetes de Poisson das funções $u(p_i, q_i, t)$ e $v(p_i, q_i, t)$

$$\{u, v\} = \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{\partial u}{\partial q_k} \frac{\partial v}{\partial p_k} - \frac{\partial v}{\partial q_k} \frac{\partial u}{\partial p_k} \right).$$

- propriedades dos colchetes de Poisson

$$\{u, v\} = -\{v, u\}, \qquad \{u, u\} = 0$$

$$\{\{u, v\}, w\} + \{\{w, u\}, v\} + \{\{v, w\}, u\} = 0, \qquad \text{(ident. de Jacobi)}$$

$$\{uv, w\} = \{u, \{v, w\}\} + \{v, \{u, w\}\}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\{u, v\} = \left\{ \frac{\partial u}{\partial t}, v \right\} + \left\{ u, \frac{\partial v}{\partial t} \right\},$$

- no caso $u = q_i$ e $v = p_j$

$$\{q_i, p_j\} = \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{\partial q_i}{\partial q_k} \frac{\partial p_j}{\partial p_k} - \frac{\partial p_j}{\partial q_k} \frac{\partial q_i}{\partial p_k} \right) = \sum_{k=1}^{n} \delta_{ik} \delta_{kj}.$$

- colchetes de Poisson fundamentais

$$\{q_i, p_j\} = \delta_{ij} \qquad \{q_i, q_j\} = 0, \qquad \{p_i, p_j\} = 0$$

- no caso $u = q_i$ e $v = H$, usando as equações de Hamilton

$$\{q_i, H\} = \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{\partial q_i}{\partial q_k} \frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial H}{\partial q_k} \frac{\partial q_i}{\partial p_k} \right) = \sum_{k=1}^{n} \delta_{ik} \dot{q}_k = \dot{q}_i,$$

- analogamente $\{p_i, H\} = \dot{p}_i$
- derivada total de uma função arbitrária $u(p_i, q_i, t)$

$$\frac{du}{dt} = \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{\partial u}{\partial q_k} \frac{dq_k}{dt} + \frac{\partial u}{\partial p_k} \frac{dp_k}{dt} \right) + \frac{\partial u}{\partial t}$$

$$= \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{\partial u}{\partial q_k} \frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial u}{\partial p_k} \frac{\partial H}{\partial q_k} \right) + \frac{\partial u}{\partial t} = \{u, H\} + \frac{\partial u}{\partial t}.$$

- se u não depender explicitamente do tempo ($\partial u / \partial t = 0$)

$$du/dt = \{u, H\}.$$

- $u(p_i, q_i)$ será uma constante (ou integral) do movimento se $du/dt = 0$. Logo $\{u, H\} = 0$
- como $\{H, H\} = 0$, então se H não depender explicitamente do tempo, a Hamiltoniana é uma constante do movimento (igual à energia E)

Dois teoremas importantes

- Teorema de Poisson: se u e v forem constantes do movimento, então $\{u, v\}$ também o será
- demonstração: se u e v não dependam explicitamente do tempo, fazendo $w = H$ na identidade de Jacobi

$$\{\{u, v\}, H\} + \{\{H, u\}, v\} + \{\{v, H\}, u\} = 0.$$

- se u e v são constantes do movimento, então $\{u, H\} = \{v, H\} = 0$, donde $\{\{u, v\}, H\} = 0$, provando que $\{u, v\}$ é uma constante do movimento.
- Teorema: os colchetes de Poisson são invariantes mediante uma transformação canônica: $(p_i, q_i) \to (P_i, Q_i)$

$$\{u, v\}_{(p,q)} = \{u, v\}_{(P,Q)}.$$

- demonstração: se as equações de Hamilton são válidas em ambos os conjuntos de variáveis, (p_i, q_i) e (P_i, Q_i), então os colchetes de Poisson fundamentais também são os mesmos:

$$\{Q_i, P_j\} = \delta_{ij}, \qquad \{Q_i, Q_j\} = 0, \qquad \{P_i, P_j\} = 0.$$

- supondo que as quantidades $u(P_i, Q_i)$ e $v(P_i, Q_i)$ não dependam explicitamente do tempo

$$\frac{\partial u}{\partial q_i} = \sum_{j=1}^{n} \left(\frac{\partial u}{\partial Q_j} \frac{\partial Q_j}{\partial q_i} + \frac{\partial u}{\partial P_j} \frac{\partial P_j}{\partial q_i} \right),$$

$$\frac{\partial u}{\partial p_i} = \sum_{j=1}^{n} \left(\frac{\partial u}{\partial Q_j} \frac{\partial Q_j}{\partial p_i} + \frac{\partial u}{\partial P_j} \frac{\partial P_j}{\partial p_i} \right),$$

- com expressões análogas para as derivadas de v
- substituindo em $\{u, v\}_{(p,q)}$ e usando os colchetes de Poisson fundamentais

$$\{u, v\}_{(p,q)} = \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{\partial u}{\partial Q_k} \frac{\partial v}{\partial P_k} - \frac{\partial v}{\partial P_k} \frac{\partial u}{\partial Q_k} \right) = \{u, v\}_{(P,Q)},$$

- os colchetes de Poisson são exemplos de *invariantes canônicos*: invariantes sob transformações canônicas.

Transformações de contato infinitesimais

- a transformação identidade $Q_i = q_i$, $P_i = p_i$ é canônica e corresponde à seguinte função geratriz de segunda espécie

$$F_2(q_i, P_i) = \sum_{j=1}^{n} q_j \, P_j .$$

- transformação de contato infinitesimal: função geratriz

$$F_2(q_i, P_i) = \sum_{j=1}^{n} q_j \, P_j + \varepsilon G(q_i, P_i, t),$$

- onde $\varepsilon \ll 1$. As equações da transformação canônica são

$$p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i} = P_i + \varepsilon \, \frac{\partial G}{\partial q_i}, \qquad Q_i = \frac{\partial F_2}{\partial P_i} = q_i + \varepsilon \, \frac{\partial G}{\partial P_i},$$

- transformações infinitesimais dos momenta e das coordenadas

$$\delta p_i = P_i - p_i = -\varepsilon \, \frac{\partial G}{\partial q_i}, \qquad \delta q_i = Q_i - q_i = \varepsilon \, \frac{\partial G}{\partial P_i}.$$

$$\frac{\partial G}{\partial P_i} = \frac{\partial G}{\partial p_i} \frac{\partial p_i}{\partial P_i} = \frac{\partial G}{\partial p_i} \left(1 + \varepsilon \, \frac{\partial^2 G}{\partial p_i \partial q_i} \right) = \frac{\partial G}{\partial p_i} + o(\varepsilon),$$

Transformações de contato infinitesimais

- substituindo na transformação

$$Q_i = q_i + \varepsilon\left(\frac{\partial G}{\partial p_i} + o(\varepsilon)\right) = q_i + \varepsilon\,\frac{\partial G}{\partial p_i} + o(\varepsilon^2).$$

- desprezando os termos de ordem ε^2 ou superiores, a variação correspondente é

$$\delta q_i = \varepsilon\,\frac{\partial G}{\partial p_i}.$$

- calculando os colchetes de Poisson da função geratriz com as coordenadas e os momenta

$$\{q_i, G\} = \sum_{k=1}^{n}\left(\frac{\partial q_i}{\partial q_k}\,\frac{\partial G}{\partial p_k} - \frac{\partial q_i}{\partial p_k}\,\frac{\partial G}{\partial q_k}\right) = \sum_k \delta_{ik}\,\frac{\partial G}{\partial p_k} = \frac{\partial G}{\partial p_i}$$

$$\{p_i, G\} = \sum_{k=1}^{n}\left(\frac{\partial p_i}{\partial q_k}\,\frac{\partial G}{\partial p_k} - \frac{\partial p_i}{\partial p_k}\,\frac{\partial G}{\partial q_k}\right) = -\sum_k \delta_{ik}\,\frac{\partial G}{\partial q_k} = -\frac{\partial G}{\partial q_i},$$

- variações das coordenadas e momenta

$$\delta p_i = \varepsilon\,\{p_i, G\}, \qquad \delta q_i = \varepsilon\,\{q_i, G\}.$$

Transformações de contato infinitesimais

- o momentum p_i é o gerador de translações espaciais infinitesimais: fazendo $G = p_i$

$$\delta p_i = \varepsilon \{p_i, p_i\} = 0, \qquad \delta q_i = \varepsilon \{q_i, p_i\} = \varepsilon,$$

- o momentum angular $\boldsymbol{\ell} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ é o gerador de rotações infinitesimais: fazendo $G = \ell_z = xp_y - yp_x$ temos que $\varepsilon = \delta\theta$ é o ângulo correspondente a uma rotação infinitesimal em torno do eixo z

$$\delta p_x = \varepsilon \{p_x, \ell_z\} = \delta\theta \{p_x, (xp_y - yp_x)\} = \delta\theta(\{p_x, xp_y\} - \{p_x, yp_x\})$$

- usando os colchetes de Poisson fundamentais

$$\{p_x, xp_y\} = -x\{p_y, p_x\} - p_y\{x, p_x\} = -p_y$$

$$\{p_x, yp_x\} = -y\{p_x, p_x\} - p_x\{y, p_x\} = 0,$$

- tal que $\delta p_x = -\delta\theta p_y$. Analogamente teremos

$$\delta p_y = \delta\theta p_x, \qquad \delta p_z = 0$$

$$\delta x = -\delta\theta y, \qquad \delta y = \delta\theta x, \qquad \delta z = 0.$$

Transformações de contato infinitesimais

- a Hamiltoniana é a geradora da evolução temporal infinitesimal: fazendo $G = H$ e $\varepsilon = dt$,

$$\delta p_i = dt\,\{p_i, H\} = dt\,\dot{p}_i = dp_i$$

$$\delta q_i = dt\,\{q_i, H\} = dt\,\dot{q}_i = dq_i,$$

- nos primeiros membros das equações acima temos as variações em p_i e q_i devido à transformação de contato infinitesimal
- nos segundos membros temos as mesmas variações num intervalo de tempo infinitesimal.
- as transformações de contato infinitesimais correspondem ao próprio movimento do sistema.

Conexão com a Mecânica Quântica

- na Mecânica Clássica as quantidades físicas, como coordenadas e momenta generalizados, são representadas por quantidades escalares ou vetoriais: A
- na Mecânica Quântica as observáveis físicas são operadores lineares e hermitianos ($\hat{A}$) que atuam sobre os vetores de estado que descrevem o sistema físico analisado
- comutador: $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\,\hat{B} - \hat{B}\,\hat{A}$
- se dois operadores comutam, então $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$
- regra de Dirac: conexão entre colchetes de Poisson e comutadores
$$\{A, B\} \to \frac{1}{i\hbar}\,[\hat{A}, \hat{B}],$$
- onde $\hbar = h/2\pi$ é a constante de Planck reduzida.
- relações de comutação fundamentais para os operadores de posição e momentum linear

$$[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\,\hbar\,\delta_{ij}, \qquad [\hat{q}_i, \hat{q}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0,$$

Conexão com a Mecânica Quântica

- na descrição de Heisenberg da Mecânica Quântica os operadores podem variar com o tempo, ao passo que os vetores de estado permanecem fixos

$$\frac{d\hat{q}_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{q}_i, \hat{H}], \qquad \frac{d\hat{p}_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{p}_i, \hat{H}],$$

- equação de Heisenberg para um operador arbitrário $\hat{A}$

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}, \hat{H}],$$

- onde $\hat{H}$ é o operador Hamiltoniano.
- se as observáveis A e H são compatíveis $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$, então $d\hat{A}/dt = 0$. Logo $\hat{A}$ é uma constante quântica de movimento: $\hat{A}(t) = \hat{A}(t = 0)$.
- Hamiltoniano de uma partícula livre

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2\right).$$

Conexão com a Mecânica Quântica

- todas as componentes do operador momentum linear comutam com H: são constantes quânticas do movimento: $\hat{p}_i(t) = \hat{p}_i(t = 0)$
- componentes do operador de posição satisfazem a relação

$$\frac{d\hat{x}_i}{dt} = \frac{1}{m}\hat{p}_i(0).$$

- cuja solução fornece as seguintes relações de comutação

$$[\hat{x}_i(0), \hat{x}_j(0)] = 0, \qquad [\hat{x}_i(t), \hat{x}_j(0)] = -\frac{i\hbar t}{m}.$$

Espaço de fase

- sistema com n graus de liberdade: espaço de fase $2n$-dimensional, cujas coordenadas são (p_i, q_i), onde $i = 1, 2, \dots n$
- elemento de volume no espaço de fase

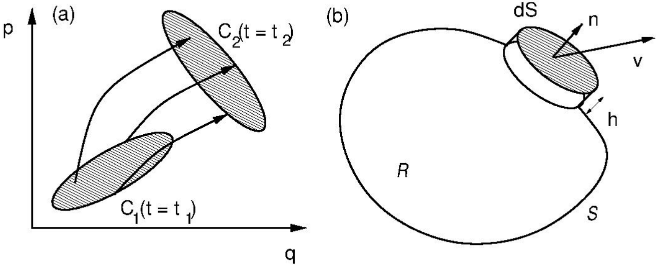
$$d\omega = dp_1\, dq_1 \dots dp_n\, dq_n = \prod_{i=1}^{n} dp_i\, dq_i.$$

- o estado do sistema mecânico é representado no espaço de fase por um único ponto, de coordenadas (p_i, q_i)
- evolução temporal do sistema: trajetória de fase, determinada pela solução das equações de Hamilton

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \qquad \frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \qquad (i = 1, 2, \dots n)$$

- dado o estado do sistema num tempo inicial $t = 0$, representado pelo ponto de coordenadas $(p_i(0), q_i(0))$ no espaço de fase, haverá uma e somente uma trajetória de fase passando por este ponto (teorema de existência e unicidade).

Densidade de pontos representativos



- transformação de regiões no espaço de fase limitadas por contornos fechados
- $\rho(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t)$ densidade de pontos no espaço de fase: $\rho(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t)\, d\omega$ é a probabilidade de encontrarmos um ponto no elemento de volume $d\omega$ do espaço de fase centrado no ponto de coordenadas (p_i, q_i), no tempo t.
- normalização: $\int d\omega\, \rho(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t) = 1$ (sobre todo o espaço de fase)
- disco infinitesimal de área dS projetando-se da superfície $\mathcal{S}$ ao longo da direção do vetor unitário $\hat{\mathbf{n}}$ perpendicular à superfície

Divergente no espaço de fase

- velocidade $\mathbf{v}$ dos pontos representativos no espaço de fase: $v_i = (\dot{p}_i, \dot{q}_i)$ (equações de Hamilton)
- número de pontos fluindo através da superfície do disco por unidade de tempo:

$$d\Phi = \frac{\rho(hdS)}{dt} = \rho(\mathbf{v}\cdot\hat{\mathbf{n}})dS$$

- fluxo líquido de pontos através da superfície $\mathcal{S}$

$$\Phi = \oint_{\mathcal{S}} dS\,\rho(\mathbf{v}\cdot\hat{\mathbf{n}}).$$

- teorema do divergente

$$\Phi = \int_{\mathcal{R}} d\omega\,\mathrm{div}\,(\rho\mathbf{v}),$$

- divergente do campo vetorial no espaço de fase

$$\mathrm{div}\,(\rho\mathbf{v}) = \sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial(\rho\dot{p}_i)}{\partial p_i} + \frac{\partial(\rho\dot{q}_i)}{\partial q_i}\right)$$

.

Equação da continuidade

- sistemas Hamiltonianos são conservativos
- como não há criação nem destruição de pontos a variação do número de pontos na região fechada $\mathcal{R}$ deve-se unicamente ao fluxo líquido de pontos pela superfície fechada $\mathcal{S}$.

$$-\frac{\partial}{\partial t}\int_{\mathcal{R}} d\omega\,\rho = \int_{\mathcal{R}} d\omega\,\mathrm{div}\,(\rho\mathbf{v}),$$

$$\int_{\mathcal{R}} d\omega\,\left(\frac{\partial\rho}{\partial t} + \mathrm{div}\,(\rho\mathbf{v})\right) = 0,$$

- para uma região arbitrária temos a equação da continuidade

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \mathrm{div}\,(\rho\mathbf{v}) = 0,$$

$$\mathrm{div}\,(\rho\mathbf{v}) = \sum_{i=1}^{n}\left(\rho\,\frac{\partial\dot{p}_i}{\partial p_i} + \frac{\partial\rho}{\partial p_i}\,\frac{dp_i}{dt} + \rho\,\frac{\partial\dot{q}_i}{\partial q_i} + \frac{\partial\rho}{\partial q_i}\,\frac{dq_i}{dt}\right).$$

Teorema de Liouville

- usando as equações de Hamilton e os colchetes de Poisson

$$\mathrm{div}\,(\rho\mathbf{v}) = \sum_{i=1}^{n}\left(\rho\,\frac{\partial \dot{p}_i}{\partial p_i} - \frac{\partial \rho}{\partial p_i}\,\frac{\partial H}{\partial q_i} + \rho\,\frac{\partial \dot{q}_i}{\partial q_i} + \frac{\partial \rho}{\partial q_i}\,\frac{\partial H}{\partial p_i}\right)$$

$$= \sum_{i=1}^{n}\left\{-\rho\,\frac{\partial^2 H}{\partial p_i \partial q_i} - \frac{\partial \rho}{\partial p_i}\,\frac{\partial H}{\partial q_i} + \rho\,\frac{\partial^2 H}{\partial q_i \partial p_i} + \frac{\partial \rho}{\partial q_i}\,\frac{\partial H}{\partial p_i}\right\}$$

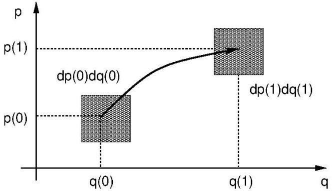
$$= \sum_{i=1}^{n}\left\{\frac{\partial \rho}{\partial q_i}\,\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial \rho}{\partial p_i}\,\frac{\partial H}{\partial q_i}\right\} = \{\rho, H\},$$

- substituindo na equação de continuidade

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \{\rho, H\} = \frac{d\rho}{dt} = 0,$$

- a densidade de pontos no espaço de fase é uma constante do movimento (fluxo no espaço de fase é incompressível)
- o volume de uma região do espaço de fase $\omega = \int_{\mathcal{R}} d\omega$ também é conservado com o passar do tempo.

Conservação de áreas no plano de fase



- $(p(1), q(1))$ e $(p(0), q(0))$ são pontos representativos nos instantes t_1 e t_0
- se $t_1 = t_0 + \delta t$, onde $\delta t \ll t_0$, expandimos

$$p(1) = p(t_0 + \delta t) = p(0) + \delta t \frac{dp(0)}{dt_0} + o(\delta t)^2 = p(0) - \delta t \frac{\partial H}{\partial q(0)} + o(\delta t)^2,$$

$$q(1) = q(t_0 + \delta t) = q(0) + \delta t \frac{dq(0)}{dt_0} + o(\delta t)^2 = q(0) + \delta t \frac{\partial H}{\partial p(0)} + o(\delta t)^2,$$

- s elementos de área no plano de fase nos tempos t_0 e t_1 estão conectados por

$$dp(1)dq(1) = |\mathcal{J}| dp(0)dq(0),$$

Conservação de áreas no plano de fase

- Jacobiano da transformação $(p(0), q(0)) \to (p(1), q(1))$

$$\mathcal{J} = \begin{vmatrix} \partial p(1)/\partial p(0) & \partial q(1)/\partial p(0) \\ \partial p(1)/\partial q(0) & \partial q(1)/\partial q(0) \end{vmatrix}$$

$$= \begin{vmatrix} 1 - \delta t \frac{\partial^2 H}{\partial p(0)\partial q(0)} & \delta t \frac{\partial^2 H}{\partial p(0)^2} \\ -\delta t \frac{\partial^2 H}{\partial q(0)^2} & 1 + \delta t \frac{\partial^2 H}{\partial q(0)\partial p(0)} \end{vmatrix} + o(\delta t)^2 = 1 + o(\delta t)^2$$

- intervalo de tempo finito $T = t_f - t_i$, subdividido em N intervalos de duração $\delta t = T/N$

$$dp(N)dq(N) = |\mathcal{J}|^N dp(0)dq(0) = [1 + o(\delta t)^2]^N dp(0)dq(0)$$

$$= \left(1 + \left(\frac{T}{N}\right)^2\right)^N dp(0)dq(0) \approx \left(1 + N\frac{T^2}{N^2}\right) dp_0 dq_0,$$

- já que $T/N \ll 1$. No limite $N \to \infty$ teremos $dp(N)dq(N) = dp(0)dq(0)$: elementos de área são conservados no plano de fase

Invariantes integrais de Poincaré

- pelo teorema de Liouville, o volume de uma região $\mathcal{R}(t)$ do espaço de fase num instante de tempo t fixo é um invariante

$$\mathcal{I}_n = \int_{\mathcal{R}(t)} d\omega = \int_{\mathcal{R}(t)} \prod_{i=1}^{n} dp_i \, dq_i$$

- $\mathcal{I}_n$ é o n-ésimo membro de uma família de invariantes integrais

$$\mathcal{I}_1 = \int\int_{\mathcal{S}_2(t)} \sum_{i=1}^{n} dp_i \, dq_i,$$

$$\mathcal{I}_2 = \int\int\int\int_{\mathcal{S}_4(t)} \sum_{i \neq k} dp_i \, dq_i \, dp_k \, dq_k,$$

$$\mathcal{I}_n = \int_{\mathcal{S}_{2n}(t)} \prod_{i=1}^{n} dp_i \, dq_i,$$

onde $\mathcal{S}_2(t)$ é uma superfície bidimensional no espaço de fase, a um tempo fixo t; $\mathcal{S}_4(t)$ é uma "superfície" quadridimensional, etc.

Invariante integral relativo

- aplicando o teorema de Stokes no invariante integral $\mathcal{I}_1$ obtemos o invariante integral relativo

$$\mathcal{J}_1 = \oint_{\mathcal{C}(t)} \sum_{i=1}^{n} p_i \, dq_i,$$

- $\mathcal{C}$ é um caminho fechado no espaço de fase num tempo fixo t
- o símbolo $\mathcal{S}_{2n}(t)$ indica uma região $\mathcal{R}(t)$ do espaço de fase $2n$-dimensional em um dado tempo.
- a aplicação do Teorema de Stokes reduz a ordem de integração por uma unidade, transformando o invariante integral $\mathcal{I}_k$ para uma dada região $\mathcal{S}_{2k}$ num invariante integral relativo $\mathcal{J}_k$ para o contorno $(2k-1)$-dimensional dessa região

Espaço de fase estendido

- mudamos a variável de integração do tempo t para um parâmetro ζ , o princíio de Hamilton é

$$\delta\left\{\int_{\zeta_1}^{\zeta_2} d\zeta\left[\sum_{i=1}^{n} p_i\,\frac{dq_i}{d\zeta}-H\,\frac{dt}{d\zeta}\right]\right\}=0,$$

- absorvemos o tempo como uma das variáveis, fazendo uma transformação canônica: função geratriz de segunda espécie

$$F_2(P_i,q_i,t)=\sum_{i=1}^{n} P_i\,q_i+P_{n+1}\,t.$$

$$p_i=\frac{\partial F_2}{\partial q_i}=P_i,\qquad Q_i=\frac{\partial F_2}{\partial P_i}=q_i,$$

$$Q_{n+1}=\frac{\partial F_2}{\partial P_{n+1}}=t,\qquad K(P_i,Q_i)=H(p_i,q_i,t)-H.$$

$$\delta\left\{\int_{\zeta_1}^{\zeta_2} d\zeta\sum_{i=1}^{n+1} P_i\,\frac{dQ_i}{d\zeta}\right\}=0.$$

Espaço de fase estendido

- espaço de fase estendido de dimensão $n+1$ descrito pelas variáveis (P_i, Q_i), e onde as trajetórias de fase são parametrizadas por ζ ao invés do tempo
- equações de Hamilton no espaço de fase estendido

$$\frac{dP_i}{d\zeta} = -\frac{\partial K}{\partial Q_i}, \qquad \frac{dQ_i}{d\zeta} = \frac{\partial K}{\partial P_i}$$

- a Kamiltoniano não depende explicitamente do tempo t: K é uma constante do movimento no espaço de fase estendido, com $t(\zeta) = \zeta$.
- a Hamiltoniana de um sistema com n graus de liberdade e dependente explicitamente do tempo, $H(p_i, q_i, t)$, é equivalente a uma Hamiltoniana para $n+1$ graus de liberdade porém independente do tempo: $K(P_i, Q_i)$. O momentum canonicamente conjugado ao tempo é $-H$.

Variável de ação

- variável de ação para o i-ésimo grau de liberdade

$$J_i = \frac{1}{2\pi} \oint p_i \, dq_i,$$

- a integral se estende sobre um ciclo completo de oscilação.
- invariante integral relativo no espaço de fase estendido

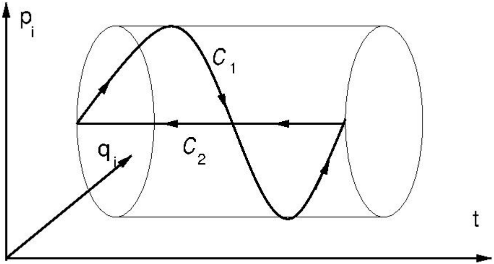
$$\mathcal{J}_1 = \oint_{\mathcal{C}} \sum_{i=1}^{n+1} p_i \, dq_i = \oint_{\mathcal{C}} \left(\sum_{i=1}^{n} p_i \, dq_i - H \, dt \right)$$

- onde $\mathcal{C}$ é um caminho fechado no espaço de fase estendido a um dado valor fixo do parâmetro ζ: escolhemos $\mathcal{C}$ tal que parte dele coincida com a trajetória no espaço de fase
- se a Hamiltoniana do sistema não depender explicitamente do tempo ela será uma constante do movimento

$$\mathcal{J}_1 = \oint_{\mathcal{C}} \sum_{i=1}^{n} p_i \, dq_i - H \oint_{\mathcal{C}} dt = \oint_{\mathcal{C}} \sum_{i=1}^{n} p_i \, dq_i = const.$$

- pois $\oint dt = 0$ para qualquer caminho fechado

Variável de ação



- dividindo o caminho $\mathcal{C}$ em duas partes: $\mathcal{C}_1$ é um caminho ao longo de um ciclo completo de oscilação, enquanto $\mathcal{C}_2$ é escolhida tal que q_i é constante, ou $dq_i = 0$.

$$\oint_{\mathcal{C}} p_i\, dq_i = \int_{\mathcal{C}_1} p_i\, dq_i + \int_{\mathcal{C}_2} p_i\, dq_i = const.$$

$$\int_{\mathcal{C}_1} p_i\, dq_i = 2\,\pi\, J_i = const.$$

- a variável de ação é proporcional ao invariante integral relativo
- ambos são constantes de movimento e invariantes canônicos

Integração numérica das equações de Hamilton

- sistemas com um grau de liberdade: $H(p, q)$
- equações de Hamilton

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H(p,q)}{\partial q}, \qquad \frac{dq}{dt} = \frac{\partial H(p,q)}{\partial p},$$

- condições iniciais: $p(t_0) = p_0$ e $q(t_0) = q_0$
- teorema de existência e unicidade: existe uma e somente uma solução $(p(t), q(t))$ que passa pela condição inicial (p_0, q_0).
- consideramos o intervalo de tempo $t_0 \leq t \leq t_f$, dividido em N sub-intervalos de tamanho $h = (t_f - t_0)/N$ (passo de integração)
- aproximação numérica para a solução:

$$p_n = p(t = t_0 + nh), \qquad q_n = q(t = t_0 + nh), \quad (n = 0, 1, 2, \ldots N),$$

a intervalos de tempo constantes (passo fixo)

Método de Euler Explícito

- se h de integração for suficientemente pequeno expandimos

$$p_1 = p(t = t_0 + h) \approx p(t = t_0) + h\left(\frac{dp}{dt}\right)_{t=t_0} = p_0 - h\left(\frac{\partial H}{\partial q}\right)_{t=t_0},$$

- de forma geral para $n = 0, 1, 2, \ldots N$ temos

$$p_{n+1} = p_n - h\frac{\partial H(p_n, q_n)}{\partial q_n}, \qquad q_{n+1} = q_n + h\frac{\partial H(p_n, q_n)}{\partial p_n}$$

- os pontos (p_n, q_n) são aproximações numéricas da solução exata $(p(t_n), q(t_n))$ em $t_n = t_0 + nh$, quer dizer, $(p_n, q_n) \approx (p(t_n), q(t_n))$
- os valores de (p_n, q_n) dependem do passo de integração h, de modo que o erro cometido é $p(t_0 + nh) - p_n$
- pode-se mostrar que o erro para o método de Euler explícito cresce com o passo h: o método é de primeira ordem.

Método de Euler implícito

- calcula as derivadas da Hamiltoniana no ponto (x_{n+1}, y_{n+1})

$$p_{n+1} = p_n - h\frac{\partial H(p_{n+1}, q_{n+1})}{\partial q_{n+1}}, \qquad q_{n+1} = q_n + h\frac{\partial H(p_{n+1}, q_{n+1})}{\partial p_{n+1}},$$

- (p_{n+1}, q_{n+1}) são determinados de maneira implícita em função de (p_n, q_n)
- Ex.: se q_{n+1} for determinado implicitamente por $f(q_{n+1}) = 0$, encontraremos o seu valor achando a raiz da função $f(x)$
- método de Newton-Raphson: fornece aproximações sucessivas para a raiz da função x^*, tal que $f(x^*) = 0$, com $f(x^*) \neq 0$
- iniciamos por um "chute" inicial x_0 (o valor de q_n)
- as aproximações sucessivas são dadas pela fórmula

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \qquad (k = 0, 1, 2, \ldots)$$

- admitimos que a sequência $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$ convirja para a raiz x^* que, por sua vez, passa a ser o valor de q_{n+1}.

Exemplo: pêndulo

- Hamiltoniana do pêndulo para $F = G = 1$:

$$H(p, q) = \frac{1}{2}p^2 - \cos q.$$

- método de Euler explícito

$$p_{n+1} = p_n - h \sin q_n, \qquad q_{n+1} = q_n + hp_n,$$

- método de Euler implícito

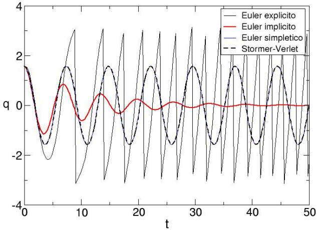
$$p_{n+1} = p_n - h \sin q_{n+1}, \qquad q_{n+1} = q_n + hp_{n+1}.$$

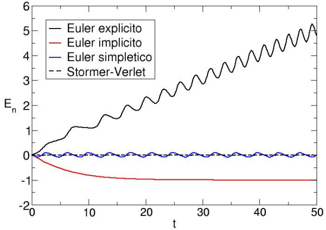
- substituindo p_{n+1} teremos a relação que determina implicitamente q_{n+1}

$$q_{n+1} + h^2 \sin q_{n+1} = q_n + hp_n,$$

- que pode ser colocada na forma $q_1 + h^2 \sin q_1 = q_0 + hp_0 \equiv C$
- o valor de q_1 será a raiz da função $f(x) = x + h^2 \sin x - C$

Comparação entre os métodos de Euler para o pêndulo





- método de Newton-Raphson

$$x_{k+1} = x_k - \frac{x_k + h^2 \sin x_k - C}{1 + h^2 \cos x_k}, \qquad (k = 0, 1, 2, \ldots)$$

- após 100 iterações temos $q_1 = x^*$, donde $p_1 = p_0 - h \sin q_1$
- energia do pêndulo ($E_0 = 0$ para $q_0 = \pi/2$ e $p_0 = 0$)

$$E_n(p_n, q_n) = \frac{1}{2} p_n^2 - \cos q_n$$

Método de Euler simplético

- requisitos para a integração numérica
  - a energia $E = H(p,q)$ deve ser conservada para quaisquer valores de (p_n, q_n);
  - as áreas no plano de fase devem ser conservadas, ou seja, $dp_{n+1}dq_{n+1} = dp_n dq_n$ para todos os tempos n
- a transformação $(p_n, q_n) \to (p_{n+1}, q_{n+1})$ é canônica (transformação de contato infinitesimal) com a função geratriz de segunda espécie

$$F_2(p_{n+1}, q_n) = p_{n+1}q_n + hH(p_{n+1}, q_n).$$

- equações da transformação canônica

$$p_n = \frac{\partial F_2}{\partial q_n} = p_{n+1} + h\frac{\partial H}{\partial q_n},$$
$$q_{n+1} = \frac{\partial F_2}{\partial p_{n+1}} = q_n + h\frac{\partial H}{\partial p_{n+1}},$$

- método de Euler simplético

$$p_{n+1} = p_n - h\frac{\partial H(p_{n+1}, q_n)}{\partial q_n}, \qquad q_{n+1} = q_n + h\frac{\partial H(p_{n+1}, q_n)}{\partial p_{n+1}}$$

Método de Störmer-Verlet

- é a composição de dois métodos de Euler simpléticos
- introduzimos, entre (p_n, q_n) e (p_{n+1}, q_{n+1}), um ponto intermediário $(p_{n+1/2}, q_{n+1/2})$
- o método é de segunda ordem (erro aumenta com h^2)
- usando metade do passo de integração

$$p_{n+1/2} = p_n - \frac{h}{2}\frac{\partial H(p_{n+1/2}, q_n)}{\partial q_n}, \qquad q_{n+1/2} = q_n + \frac{h}{2}\frac{\partial H(p_{n+1/2}, q_n)}{\partial p_{n+1/2}}$$

- para a segunda metade do intervalo

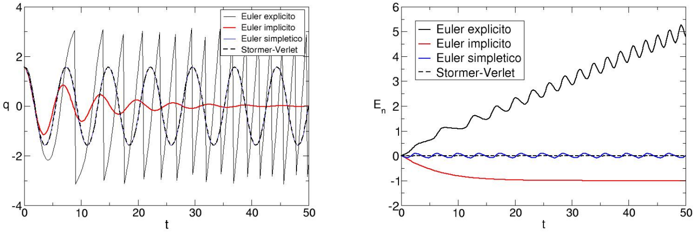
$$p_{n+1} = p_{n+1/2} - \frac{h}{2}\frac{\partial H(p_{n+1/2}, q_{n+1})}{\partial q_{n+1}}, q_{n+1} = q_{n+1/2} + \frac{h}{2}\frac{\partial H(p_{n+1/2}, q_{n+1})}{\partial p_{n+1/2}}$$

- combinando as duas expressões

$$p_{n+1/2} = p_n - \frac{h}{2}\frac{\partial H(p_{n+1/2}, q_n)}{\partial q_n}, \quad p_{n+1} = p_{n+1/2} - \frac{h}{2}\frac{\partial H(p_{n+1/2}, q_{n+1})}{\partial q_{n+1}}.$$

$$q_{n+1} = q_n + \frac{h}{2}\left\{\frac{\partial H(p_{n+1/2}, q_n)}{\partial p_{n+1/2}} + \frac{\partial H(p_{n+1/2}, q_{n+1})}{\partial p_{n+1/2}}\right\},$$

Comparação entre os métodos simpléticos para o pêndulo



- a Hamiltoniana é separável: ambos os métodos tornam-se explícitos

$$H(p,q) = T(p) + U(q) = \frac{p^2}{2} - \cos q$$

- energia do pêndulo ($E_0 = 0$ para $q_0 = \pi/2$ e $p_0 = 0$)

$$E_n(p_n, q_n) = \frac{1}{2} p_n^2 - \cos q_n$$